

О Т З Ы В

на автореферат диссертации Акзамовой Полины Александровны "Сверхтонкие взаимодействия в оксидах $3d^1$ переходных металлов со структурами перовскита и пироклора", представленной на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.11 – физика магнитных явлений

Тематика исследований П.А. Акзамовой представляется важной и интересной. Действительно, в настоящее время пристальное внимание исследователей привлекают сложные оксидные материалы, содержащие ионы с орбитальным вырождением или квазивырождением электронных уровней (ян-теллеровские ионы), например, ионы Ti^{3+} и V^{4+} , входящие в состав систем со структурой перовскита и пироклора. Отличительная особенность подобных материалов состоит в тесной взаимосвязи спиновых, зарядовых и орбитальных степеней свободы, а также богатство их фазовой диаграммы, привлекающих к ним интерес, как с точки зрения фундаментальной физики, так и возможных приложений. Для описания явлений, обусловленных взаимосвязью орбитальной и спиновых структур, широко используется даже такой термин, как орбитальная физика. Важнейшим экспериментальным методом исследования орбитального порядка является использование ядерного магнитного резонанса (ЯМР). Однако интерпретация получаемых ЯМР-данных зачастую представляет собой трудоёмкую задачу, поскольку требуется детальная информация о параметрах сверхтонкого взаимодействия на ядрах магнитных и немагнитных ионов. Решению этой актуальнейшей задачи и посвящена диссертационная работа П.А. Акзамовой, в которой параметры сверхтонкого взаимодействия для представляющих широкий интерес оксидов рассчитываются как из первых принципов, так и с использованием модельного микроскопического подхода, что позволяет получать данные, отличающиеся высокой надёжностью и достоверностью.

В диссертации получен целый ряд новых фундаментальных результатов. Разработаны методы расчёта сверхтонких взаимодействий на ядрах магнитных и немагнитных ионов в широком классе оксидов переходных металлов с орбитальным вырождением. В частности, продемонстрировано, что изотропное и анизотропное сверхтонкое взаимодействия на ядрах титана, ванадия и др. сравнимы по величине, что необычайно ценно для интерпретации эксперимента. При этом ясно показано, что орбитальное состояние ионов ванадия и титана вносит определяющий вклад в анизотропное сверхтонкое взаимодействие. Разработана детальная микроскопическая модель, позволившая наглядно проиллюстрировать влияние орбитальной и магнитной структуры на параметры сверхтонкого взаимодействия в различных соединениях.

Диссертационная работа прошла широкую апробацию. По материалам диссертации опубликовано 5 статей в рецензируемых научных журналах, рекомендованных ВАК; имеется также 17 публикаций в материалах конференций. Достоверность полученных результатов обеспечивается строгой обоснованностью принятых приближений и допущений. Автореферат хорошо написан и чётко структурирован.

У меня имеется несколько замечаний. В автореферате говорится, что расчёты из первых принципов проводились в рамках двух подходов, кластерного и для периодического кристалла. Однако не указывается, каковы преимущества и недостатки того или иного подхода и как различаются полученные результаты. Не поясняется также, какие допущения делаются при нахождении компонент тензора анизотропного сверхтонкого взаимодействия на основе расчётов электронной зонной структуры из первых принципов. При обсуждении Таблицы 1 утверждается, что рассчитанные и экспериментальные значения частоты квадрупольного резонанса согласуются друг с другом. Но результаты расчёта и эксперимента отличаются примерно в два раза. Где же тогда согласование? Кстати, из автореферата следует, что результаты диссертационной работы докладывались на конференциях, начиная с 2009 г., в то время как первая журнальная публикация датирована 2013 годом. Неясно, с чем связано такое расхождение.

Приведённые выше замечания касаются скорее формы изложения, чем сути результатов работы, и не влияют на общую положительную оценку диссертации, которая представляет собой законченное комплексное исследование, посвященное актуальной проблеме физики магнитных явлений и выполненное на высоком научном уровне. Автореферат демонстрирует высокую квалификацию автора как физика-теоретика, прекрасно владеющего как численными, так и аналитическими методами расчёта, и могущего применять полученные данные к детальному описанию конкретного эксперимента.

По объёму и оригинальности полученных результатов, достоверности, научной и практической ценности диссертационная работа удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым ВАК к кандидатским диссертациям, а её автор П.А. Акзамова несомненно заслуживает присуждения ей учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.11 – физика магнитных явлений.

Ведущий научный сотрудник лаборатории теоретической
электродинамики конденсированных сред,
ФГБУН Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН
к. ф.-м. н. Климент Ильич Кугель

125412 Россия, г. Москва, ул. Ижорская 13, ИТПЭ РАН
тел: 8 495 3625147, e-mail: kugel@orc.ru

"Подпись К.И. Кугеля удостоверяю"
Учёный секретарь ИТПЭ РАН 
к. ф.-м. н.

А.Т. Кунавин

125412 Россия, г. Москва, ул. Ижорская 13, ИТПЭ РАН
тел: 8 495 4859172, e-mail: akunavint45@mail.ru

*С отзывом ознакомлена
14.06.2017, Акзамова П.А.*